arXiv:2603.05885v1 [stat.OT] 6 Mar 2026

不确定性下的贝叶斯线性规划：后验可行性保证、情景认证与应用

Debashis Chatterjee*[1,2]

[1]统计学系，维斯瓦-巴拉蒂大学，圣蒂尼克坦，印度[2]S. N. Bose国家基础科学中心，加尔各答，印度

2026年3月9日

摘要

线性规划广泛应用于科学、工程和运筹学中的决策，但在许多现代应用中，进入约束和目标函数的系数并不确知，必须从数据中学习。经典的随机优化和鲁棒优化为处理此类不确定性提供了两种具有重要影响力的范式，但它们通常将底层不确定性描述视为给定条件，并未直接整合先验分布以及更新为后验分布后的保证。本文提出一个用于线性规划的贝叶斯框架，在该框架中，不确定量以概率方式建模，通过观测数据进行更新，并通过后验可行性要求将其传播到优化过程中。我们提出两种互补的计算策略：一种是可信区域鲁棒化，将后验不确定性转换为确定性保护；另一种是后验情景方法，利用采样得到的后验实现值构造具有有限样本可解释性的易处理优化问题。我们还提出一种蒙特卡洛认证程序，为残余不可行性提供保守且以数据为条件的评估。仿真实验表明，与朴素的即插即用决策相比，所提方法能够显著提高安全性；同时，基于单细胞转录组数据的真实数据研究表明，该方法能够生成具有科学可解释性的决策，并提供明确的、考虑不确定性的可行性诊断。所提方法论在贝叶斯学习、不确定性下的优化与实际决策认证之间建立了统一的桥梁。

关键词： 不确定性下的贝叶斯优化；线性规划；后验可行性；机会约束决策；基于情景的优化；不确定性量化；决策认证。

1 引言

线性规划（LP）是 Operations Research 和工程领域的基础工具，但其经典形式假设输入数据（目标函数和约束系数）已精确获知。在许多应用中——如产能规划、收益管理、库存控制、能源调度和投资组合配置——这些系数是根据历史数据估计得出的，或由预测模型生成，因此不确定性是其内在特征。

*通讯作者：debashis.chatterjee@visva-bharati.ac.in

优化领域应对不确定性有两大主要传统。随机规划和机会约束规划将系数视为随机变量，并要求约束以高概率成立 [9, 10]。然而，这些模型通常假设概率律已知。鲁棒优化则要求对于预先指定的不确定性集中的所有参数取值，问题都保持可行，从而提供最坏情形保护，但有时会因此过于保守[1, 3, 5]。

本文聚焦于这样一种情形：不确定性是从数据中学习得到的，并且可自然地表示为后验分布。贝叶斯决策理论提供了一个连贯的框架，可用于依据观测数据进行条件化，并选择能够优化后验期望效用的行动[2]。然而，对于线性规划的可行性而言，如何将后验不确定性转化为具有实际意义的保证，尚无统一规范。

研究目标。 本文旨在为线性规划构建一个具有统计学依据的框架，适用于关键优化输入并非固定不变，而是从数据中学习得到且在估计后仍存在不确定性的情形。我们的目标是超越代入式优化，构造不仅依据所学习信息达到最优，而且附有明确且以数据为条件的可行性保证的决策。

创新与贡献。 本研究的主要贡献在于通过后验可行性这一概念，将贝叶斯学习与线性优化统一起来，从而把不确定性量化直接嵌入优化阶段，而不是将其视为事后单独修正。具体而言，本文在四个方面作出贡献。首先，提出一种以观测数据为条件的贝叶斯可行性概念，因此与统计学习自然契合。其次，提出两种易于处理的方法来确保此类可行性，即可信区域鲁棒化策略和后验情景策略。第三，为优化补充了一个实用的认证步骤，用于对学习所得后验分布下的残余不可行性作出保守的经验评估。最后，通过模拟和真实遗传数据证明，该框架能够给出易于解释、考虑不确定性且比朴素代入式方案更安全的决策。综上，这些贡献使贝叶斯线性规划成为现代统计推断与不确定性下的优化相结合的统一框架。

2 相关工作

不确定性下的优化已在多个研究领域得到广泛研究，包括随机规划、机会约束优化、鲁棒优化和基于情景的优化。本文提出的框架在概念上受到这些领域的启发，同时引入了一种独特的贝叶斯视角：从数据中学习不确定性，并通过后验分布将其传递到决策保证中。

机会约束优化。 机会约束规划是处理优化问题中不确定性的最早方法之一。在这一范式下，约束条件必须在给定概率分布下以高概率成立。基础性论述见于Pr´ekopa [9] 的研究，以及Shapiro 等人 [10]撰写的现代随机规划教材。尽管这些方法提供了优雅的概率表述，但通常假设支配不确定性的基础分布已知或由外部指定。相比之下，我们的工作聚焦于必须从数据中学习分布的情形，因此自然地用后验分布来表示该分布。

鲁棒优化。另一种具有重要影响的方法是鲁棒优化，其要求对于指定不确定性集内的所有参数取值，约束条件都必须成立。奠基性研究包括 Ben-Tal 等人提出的鲁棒优化框架 [1] 以及 Bertsimas 和 Sim 开发的可处理鲁棒对应形式 [3]。后续研究进一步探讨了数据驱动和自适应不确定性集 [5]。鲁棒优化提供了强有力的最坏情况保证，但当不确定性集过大或定义过于宽泛时，可能过于保守。本文提出的可信区域鲁棒化方法可解释为一种数据驱动的鲁棒优化模型，其中不确定性集由贝叶斯后验可信区域导出。

基于情景的优化。情景法提供了一种替代策略，即用有限组抽样情景替代不确定约束。由此得到的优化问题要求在抽样实现值上满足可行性，同时理论结果对违反概率给出上界。Calafiore 和 Campi [6] 以及 Campi 和 Garatti [7], 奠定了关键的理论基础，他们为带抽样约束的凸优化问题推导出了明确的有限样本保证。我们的后验情景形式直接建立在这一理论之上，关键区别在于，抽样分布是基于观测数据得到的贝叶斯后验分布。

机会约束的凸近似。多位学者研究了概率约束的凸保守近似，尤其是在凸优化领域。Nemirovski 和 Shapiro [8], 的研究作出了重要贡献，他们针对分布假设下的机会约束，提出了易于处理的近似方法。这些方法为概率可行性提供了便于计算的替代方案，但通常采用频率学派框架或预先指定分布的框架，而非贝叶斯学习范式。

贝叶斯决策理论与优化。将后验不确定性纳入决策的概念基础在于贝叶斯决策理论 [2]。在这一框架中，最优决策是基于以观测数据为条件的后验分布作出的。尽管贝叶斯决策理论已广泛应用于统计学和机器学习，但它与经典线性规划形式的结合却相对少受关注。本研究通过引入后验可行性约束，并将贝叶斯推断与基于情景的可行性认证相结合，为这一方向作出了贡献。

相对于现有文献的贡献。现有方法通常将不确定性视为已知的概率结构（随机规划）、最坏情形扰动（鲁棒优化），或来自固定分布的抽样情景（情景优化）。相比之下，本文提出的框架将统计学习与不确定性下的优化整合到统一流程中。首先通过贝叶斯推断从数据中学习不确定性，随后通过后验可行性约束将其纳入优化问题，最后通过蒙特卡洛诊断进行认证。这种整合提供了一种原则性机制，可将统计不确定性转化为运营决策保证。

3 问题设置

令 $x \in \mathbb{R}^n$ 为决策向量。考虑一个由参数 $\theta \in \Theta$索引且具有不确定系数的线性规划:

$$\max_{x \in \mathcal{X}} \; c(\theta)^\top x \quad \text{s.t.} \quad A(\theta)x \le b(\theta), \tag{1}$$

其中 $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ 表示额外的确定性约束（例如界限、整数性松弛、平衡约束）。将第 i 个不确定不等式写为

$$g_i(x, \theta) := a_i(\theta)^\top x - b_i(\theta) \le 0, \qquad i = 1, \dots, m, \tag{2}$$

其中 $a_i(\theta)^\top$ 是 $A(\theta)$ 的第 i 行。

3.1 系数的贝叶斯学习

假设我们观测到与 θ 相关的数据 D （例如需求、产能、产量、回归特征和结果的历史样本）。贝叶斯模型指定先验分布 $p(\theta)$ 和似然函数 $p(D \mid \theta)$，从而得到后验分布

$$p(\theta \mid D) \propto p(D \mid \theta) p(\theta).$$

我们假设后验抽样是可行的（精确或近似地），即可以生成独立同分布的 $\theta^{(1)}$、.....、$\theta^{(N)} \sim p(\theta \mid D)$。

3.2 决策准则

贝叶斯决策者可以在满足后验可行性约束的条件下，最大化后验期望目标 $\mathbb{E}[c(\theta)^\top x \mid D]$ 。本文重点关注可行性保证（这通常是安全/运营要求的首要考量），同时允许采用风险中性或风险规避的目标函数。

3.3 后验可行性

定义 3.1 （后验可行性与违约）。 给定数据 D，定义决策 x 的**后验违反概率** 为

$$V_D(x) := \mathbb{P}_{\theta \mid D}\Big(\exists\, i \in \{1, \dots, m\} : g_i(x, \theta) > 0 \Big). \tag{3}$$

我们称 x 为 $(1 - \alpha)$ **后验可行**，若 $V_D(x) \le \alpha$。

因此，后验可行性是一种机会约束，其概率律等于以观测数据为条件的后验分布。这在概念上与贝叶斯决策理论相一致 [2] ，并且与机会约束规划相关 [9, 10]。

注释 3.1（解释）。后验可行性是一种条件性陈述：它界定了在 $p(\theta \mid D)$ 下的约束违约概率。这不同于频率学派保证，后者必须对 D 的重复抽样均成立。这两种概念都具有价值；本文聚焦于贝叶斯（条件）保证，并明确计入蒙特卡洛近似误差。

4 方法论

4.1 贝叶斯机会约束线性规划

具有后验可行性的典型贝叶斯线性规划如下：

$$\max_{x\in\mathcal{X}} \mathbb{E}[c(\theta)^\top x \mid D] \quad \text{s.t.} \quad V_D(x) \le \alpha. \tag{4}$$

问题 (4) 通常较为困难，因为 $V_D(x)$ 涉及不等式并集的概率。

现在，我们提出两种可处理的策略，以提供后验可行性保证。

4.2 可信集鲁棒化

令 $\mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \subseteq \Theta$ 为一个可测的可信区域，使得

$$\mathbb{P}(\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \mid D) \ge 1-\alpha. \tag{5}$$

考虑鲁棒化约束

$$g_i(x,\theta) \le 0 \quad \forall \theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D),\ i=1,\dots,m. \tag{6}$$

命题 4.1 (可信集鲁棒化蕴含后验可行性)。 若 x 满足 (6)且 $\mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$ 满足 (5)，则 x 是 ($1-\alpha$) 后验可行的，即 $V_D(x) \le \alpha$。

证明。 若 $\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$，则由 (6) 可知所有约束均成立。因此，只有在$\theta \notin \mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$时才可能发生违反：

$$V_D(x) \le \mathbb{P}(\theta \notin \mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \mid D) \le \alpha,$$

其中，最后一个不等式由 (5) 得出。 □

高斯后验导出二阶锥 (SOC) 形式。 一种常见情形是每个约束行都具有近似高斯后验。令

$$u_i(\theta) := \begin{bmatrix} a_i(\theta) \\ b_i(\theta) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}, \qquad z(x) := \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix},$$

从而

$$g_i(x,\theta) = u_i(\theta)^\top z(x).$$

假设

$$u_i(\theta) \mid D \approx \mathcal{N}(\bar{u}_i, \Sigma_i).$$

为了通过逐行可信区域获得总体后验可行性保证，我们采用 Bonferroni 校正并定义

$$\mathcal{C}_{1-\alpha/m,i}(D) := \left\{ u :\ (u-\bar{u}_i)^\top \Sigma_i^{-1} (u-\bar{u}_i) \le \chi^2_{n+1}(1-\alpha/m) \right\}.$$

要求对所有 $u \in \mathcal{C}_{1-\alpha/m,\ i}(D)$，$u^\top z(x) \le 0$，可得到二阶锥约束

$$\bar{u}_i^\top z(x) + \kappa_{\alpha/m} \left\| \Sigma_i^{1/2} z(x) \right\|_2 \le 0, \qquad \kappa_{\alpha/m} := \sqrt{\chi^2_{n+1}(1-\alpha/m)}. \tag{7}$$

根据并集界，对所有 $i = 1$、.....、 m 强制执行这些逐行鲁棒约束，即可在 $1-\alpha$ 水平上保证总体后验可行性。因此，可信集鲁棒化可以

将贝叶斯不确定性转化为确定性锥规划，从而直接衔接鲁棒优化传统 [1, 4]。更一般地，Nemirovski 和 Shapiro 研究了机会约束的凸保守近似 [8]。

优点/缺点。可信集鲁棒化可以得出简洁的推论（命题4.1），但可能较为保守，因为它要求对某个区域内所有参数都满足约束，而不仅仅是在后验概率较高时满足约束。

4.3 有限样本界下的后验情景近似

另一种途径是通过抽样约束来近似（4）：

$$\max_{x\in\mathcal{X}} \ \mathbb{E}[c(\theta)^\top x \mid D] \quad \text{s.t.} \quad g_i(x,\theta^{(k)}) \le 0,\ \forall i=1,\dots,m,\ \forall k=1,\dots,N, \tag{8}$$

其中 $\theta^{(1)}$、……、$\theta^{(N)}$ 独立同分布$\sim$ $p(\theta \mid D)$。如果抽样约束关于 x 是线性的，那么这就是一个线性规划。

情景法研究此类随机约束抽样，并为所得解的违约概率提供明确的界限 [6, 7]。我们给出一个适用于后验设定的标准情景理论界限；这是对 Calafiore 和 Campi [6] 以及 Campi 和 Garatti [7] 的情景结果在给定数据条件下的具体应用。

定理 4.1（后验情景违约界（情景法））。假设 $\mathcal{X}$ 是凸且紧的，并且 $g_i(\cdot,\ \theta)$ 对每个 θ都是凸的。设 x_N 是基于N 个独立同分布后验样本得到的（ d 表示支撑秩（在许多线性规划设定中至多为 n））的一个最优解。那么对于任意 $\varepsilon \in (0,\ 1)$，

$$\mathbb{P}\Big(V_D(x_N) > \varepsilon\Big) \ \le \ \sum_{j=0}^{d-1} \binom{N}{j} \varepsilon^j (1-\varepsilon)^{N-j}, \tag{9}$$

其中，概率是针对用于构造 (8) 的后验抽样而言。

备注 4.1。 定理 4.1 是将情景法可行性结果直接应用于不确定凸规划 [6, 7]。在我们的语境中，“不确定性分布”就是后验分布$p(\theta \mid D)$，因此所得保证针对的是后验违反概率。

推论 4.1（选择 N 以达到目标后验可行性水平）。 给定目标后验违反 ε 和置信度 δ。若 N 满足

$$\sum_{j=0}^{d-1} \binom{N}{j} \varepsilon^j (1-\varepsilon)^{N-j} \le \delta,$$

那么，以至少 $1-\delta$ 的概率（针对后验抽样），有 $V_D(x_N) \le \varepsilon$。

优缺点。 后验情景线性规划通常易于求解（仍然是线性规划），并可提供可调节的违约保证。其主要代价是需要抽样并求解规模更大的线性规划；主要建模优势是相较于鲁棒化，保守性更低。

4.4 解后蒙特卡洛认证

即使求解了（8）或鲁棒化规划，估计 $V_D(x)$本身仍然很有用。

给定一个候选解 $\hat{x}$，抽取一个独立的后验样本 $\{\tilde{\theta}^{(\ell)}\}_{\ell=1}^{M} \sim p(\theta \mid D)$。令

$$\hat{V}_M(\hat{x}) := \frac{1}{M}\sum_{\ell=1}^{M} \mathbf{1}\Big\{\exists i:\ g_i(\hat{x}, \tilde{\theta}^{(\ell)}) > 0\Big\}.$$

通过对后验违反概率 $V_D(\hat{x})$ 作二项反演（Clopper–Pearson），可得到保守的单侧 ($1-\beta$) 置信上界。等价地，由此得到后验可行性概率 $1 - V_D(\hat{x})$ 的置信下界。

$$V_D(\hat{x}) \le \mathrm{BetaInv}\big(1-\beta;\ s+1,\ M-s\big), \quad s := \sum_{\ell=1}^{M} \mathbf{1}\Big\{\exists i:\ g_i(\hat{x}, \tilde{\theta}^{(\ell)}) > 0\Big\},$$

其中 BetaInv 是 Beta 分布的分位数。这一步是一种实用诊断：它并不取代定理 4.1 ，而是以明确的经验检验对其加以补充。

5 算法概要

算法 1 具有后验可行性保证的贝叶斯线性规划 **要求：** 数据 D，$\theta \mid D$ 的后验采样器，可行集 $\mathcal{X}$，风险水平 α**1:** 拟合贝叶斯模型并获得对样本 $\theta \sim p(\theta \mid D)$ 的访问 **2:** 选择以下之一：**(A)** 带可信区域 $\mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$ 的可信集鲁棒化 **(B)** 样本量为 N 、针对目标 (ε, δ) 的后验情景近似 **3:** 若 **(A)** 则 **4:** 构造 $\mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$，使得 $\mathbb{P}(\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \mid D) \ge 1-\alpha$**5:** 求解 $\max_{x\in\mathcal{X}} \mathbb{E}[c(\theta)^\top x \mid D]$ s.t. $g_i(x,\theta) \le 0$ 对所有 $\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$ **6:** 输出 $\hat{x}$**7:** 否则 **8:** 抽取 $\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(N)} \sim p(\theta \mid D)$ 独立同分布 **9:** 求解情景线性规划 **(8)** 以得到 x_N**10:** 输出 $\hat{x} := x_N$ 并附带定理 **4.1** 的违反保证 **11:** 结束 **if 12:** 认证：抽取 $\tilde{\theta}^{(1)}, \dots, \tilde{\theta}^{(M)} \sim p(\theta \mid D)$，并估计/求 $V_D(\hat{x})$ 的上界

6 模拟研究：贝叶斯线性规划中的后验可行性

6.1 设计与评估方案

我们考虑一个利润最大化生产线性规划，其中包含 $n = 18$ 个决策变量和 $m = 7$ 个资源约束，

$$\max_{x\in\mathbb{R}^n} \quad p^\top x \qquad \text{s.t.} \qquad Ax \le b, \quad 0 \le x \le x_{\max}\mathbf{1}, \tag{10}$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和 $p \in \mathbb{R}^n$ 的元素均为正值，且在一次蒙特卡洛运行中保持固定，而资源容量 $b \in \mathbb{R}^m$ 不确定，需通过数据进行学习。

数据生成过程。在每次试验中，我们为每种资源抽取一个“真实”的线性模型$j \in \{1, \dots, m\}$:

$$b_j = x_{\mathrm{ctx}}^\top \beta_j^\star + \varepsilon_j, \qquad \varepsilon_j \sim \mathcal{N}(0, (\sigma_j^\star)^2),$$

其上下文向量为 $x_{\text{ctx}} \in \mathbb{R}^d$（包括截距；此处 $d = 6$），并生成 $N_{\text{obs}} = 90$条历史观测，以学习 $\beta_j^\star$ 和（$\sigma_j^\star$）^{2}。随后，我们使用由以下各方法生成的容量向量 $\hat{b}$求解（10）。

贝叶斯学习模型。 对于每种资源 j，我们拟合共轭正态–逆伽马贝叶斯线性回归，从而得到下一周期容量 $b_j \mid D$（Student-t）的显式后验预测分布。后验样本用于基于情景的优化，以及对后验违反进行独立的蒙特卡洛"认证"。

比较的方法。 我们评估五种方法：

- **PM（后验均值代入）：** $b_j = \mathbb{E}[b_j \mid \hat{D}]$（忽略风险的基线方法）。
- **CR（可信集鲁棒化）（我们的方法）：** 采用带并集界的逐资源下预测分位数，

$$\hat{b}_j = Q_{\,\alpha/m}(b_j \mid D), \qquad j = 1, \ldots, m,$$

  因此，根据并集界逻辑，$P_{\theta|D}$（所有约束均成立）$\gtrsim 1 - \alpha$。

- **PS（后验情景）（我们的方法）：** 抽取 $N_{\text{情景}} = 300$ 个独立同分布的后验预测样本 b，并强制满足所有抽样约束；这等价于逐分量求解 $\hat{b} = \min_{k \le N_{\text{情景}}} b_{(k)}$。

- **FPQ（频率派预测分位数）：** 采用 Student-t预测分位数进行普通最小二乘拟合，每个约束再次使用 α/m。

- **RB（鲁棒盒启发式）：** $b_j = \mu_j - z_{1-\alpha/m}\, s_j$ 采用正态 z-分数启发式。

在所有情况下，线性规划（10）均使用标准凸求解器求解，且仅保留状态为最优（或近似最优）的解。

指标。对于计算得到的决策 $\hat{x}$，我们估计：

1. **利润** $p^\top \hat{x}$。
2. **真实样本外违约概率**

$$\widehat{V}_{\text{true}}(\hat{x}) = \frac{1}{M} \sum_{\ell=1}^{M} \mathbf{1}\Big\{ A\hat{x} \not\leq b_{\text{true}}^{(\ell)} \Big\},$$

   使用来自真实数据生成分布的 $M = 5000$ 个新样本。

3. **后验违反估计与保守后验认证：**根据 $M_{\text{cert}} = 5000$ 个后验预测抽样得到的估计值 $V_{\text{post}}(\hat{x})$，以及 Clopper–Pearson 单侧 95%上界$V_{\text{post, UB95}}(\hat{x})$。

对每个目标进行 60 次试验 $\alpha \in \{0.01, 0.05, 0.10\}$（每种方法共 180 个线性规划实例）。

6.2 汇总结果与讨论

主要定量摘要。 表 1按方法和目标风险报告利润的均值（及标准差）以及真实违反概率的均值（及标准差）α。表2汇总所有 α。

表1：按目标风险水平汇总的模拟结果 α （每个 α 进行60次试验）。报告平均利润及其标准差、平均真实违反概率及其标准差，以及后验违约诊断（蒙特卡洛均值），其中包括保守的95%上界。

α	方法	n	利润均值	利润标准差	$\widehat{V}_{\text{true}}$ mean	sd	$\widehat{V}_{\text{post}}$ mean	$\widehat{V}_{\text{后验分布,95%上界}}$ mean
0.0100	CR	60	556.2547	94.8090	0.0073	0.0080	0.0048	0.0067
0.0100	FPQ	60	543.7832	96.5516	0.0047	0.0057	0.0028	0.0043
0.0100	PM	60	759.5913	79.4713	0.9051	0.0859	0.9121	0.9184
0.0100	PS	60	558.3245	101.4542	0.0127	0.0125	0.0091	0.0115
0.0100	RB	60	561.7612	94.2242	0.0090	0.0097	0.0061	0.0082
0.0500	CR	60	582.6296	80.3209	0.0302	0.0169	0.0239	0.0277
0.0500	FPQ	60	572.3997	80.8666	0.0210	0.0123	0.0165	0.0198
0.0500	PM	60	751.3455	77.3139	0.9291	0.0522	0.9309	0.9365
0.0500	PS	60	551.4119	87.7301	0.0140	0.0108	0.0117	0.0144
0.0500	RB	60	585.8197	80.2025	0.0338	0.0184	0.0270	0.0311
0.1000	CR	60	622.2889	79.5292	0.0557	0.0247	0.0468	0.0520
0.1000	FPQ	60	613.4360	80.6589	0.0425	0.0206	0.0343	0.0388
0.1000	PM	60	766.1454	69.1882	0.9162	0.0508	0.9207	0.9267
0.1000	PS	60	567.8640	80.7549	0.0125	0.0108	0.0094	0.0119
0.1000	RB	60	624.6181	79.3269	0.0604	0.0262	0.0511	0.0565

表2：所有 $\alpha \in \{0.01, 0.05, 0.10\}$ 的总体汇总（每种方法运行180次）

方法	n	利润均值	利润标准差	$\widehat{V}_{\text{true}}$ mean	$\widehat{V}_{\text{post}}$ mean	$\widehat{V}_{\text{post,UB95}}$ mean
CR	180	587.0577	88.9643	0.0311	0.0252	0.0288
FPQ	180	576.5396	90.5220	0.0227	0.0179	0.0210
PM	180	759.0274	75.2771	0.9168	0.9212	0.9272
PS	180	559.2001	90.1374	0.0131	0.0101	0.0126
RB	180	590.7330	88.2892	0.0344	0.0281	0.0319

图 4 展示每种 α下各方法的平均利润。图 8 展示每种 α下各方法的平均真实违规概率，虚线标示目标 α。图 9绘制风险校准曲线（实现的违约与目标 α的对比）。图10可视化所有试验中的经验利润—风险权衡。图 11 报告保守后验认证的均值$\widehat{V}_{\text{post, UB95}}$ 与 α的对比。

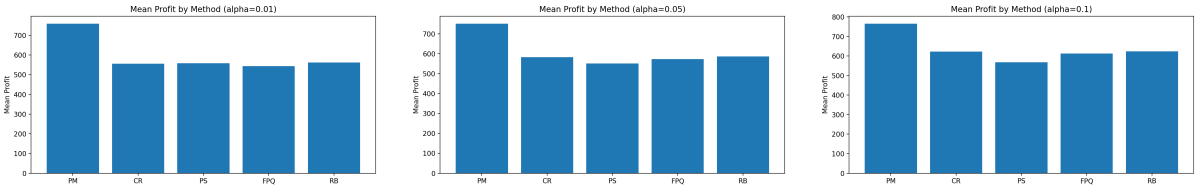


图 1：*
(a) $\alpha = 0.01$

图 2：*
(b) $\alpha = 0.05$

图 3：*
(c) $\alpha = 0.10$

图 4：各目标风险水平下各方法的平均利润 α。

6.3 主要发现

表格1–2和图4–11 支持以下结论。

1. **位置验均值代入法是不安全的。** 后验均值获得最高利润，但表现出灾难 s-

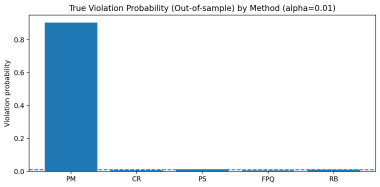


图5：*
(a) $\alpha = 0.01$

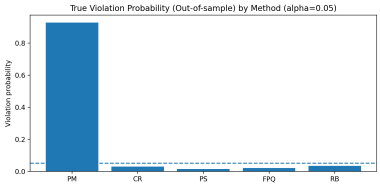


图6：*
(b) $\alpha = 0.05$

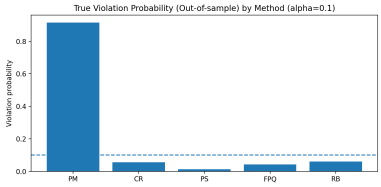


图7：*
(c) $\alpha = 0.10$

^图8：按方法统计的平均真实样本外违反概率 V_{true}。水平虚线表示目标 α。

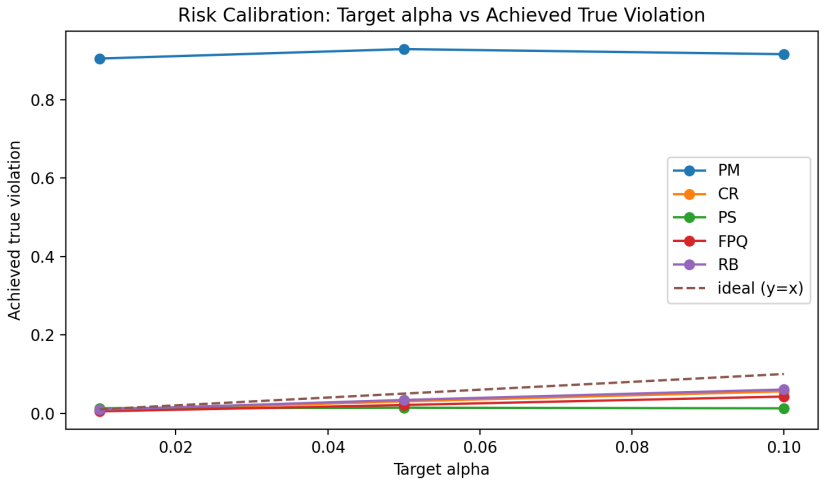


图9：风险校准：实际真实违反与目标 α 的对比（对角线表示理想校准）。

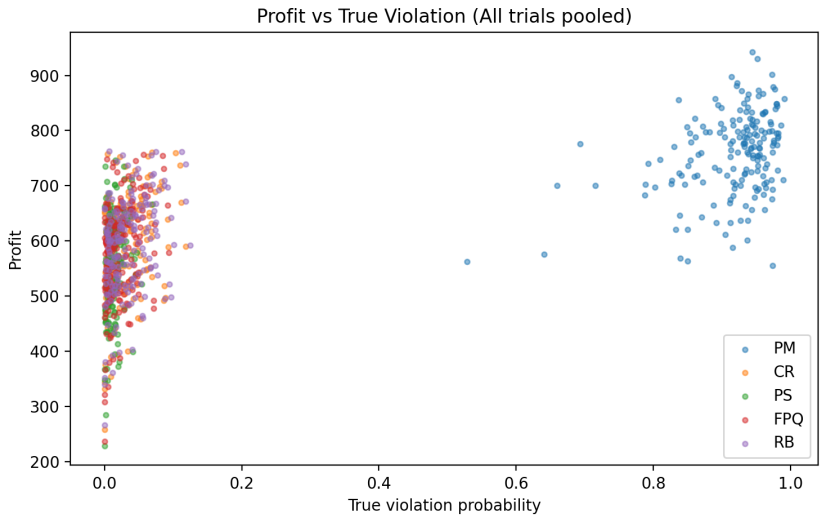


图10：汇总所有试验的利润—风险权衡：利润与真实违反概率的散点图。

^营养级不可行性： $V_{\text{true}} \approx 0.91$ 在所有 α中，这表明忽略不确定性可能产生利润极高但操作上无效的决策。

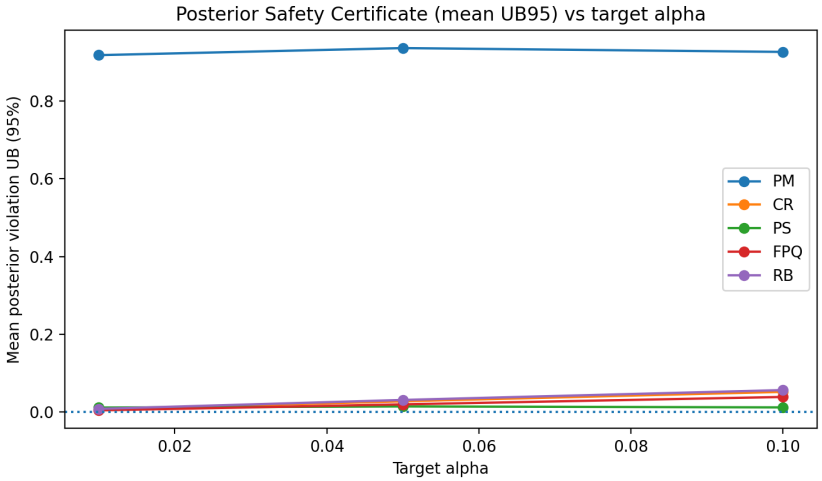


图11：后验安全证书：均值保守上界 $V_{\text{post, UB95}}$ 与目标值的对比α。

2. **所提出的 PS 方法在**本次模拟的安全性方面表现最佳。汇总所有 α 水平后，PS 的平均真实违约率最低（表。2 中为 0.0131），且在 $\alpha = 0.05$ 和 $\alpha = 0.10$ （表1）处，它也是违约率最低的方法。因此，在当前的线性高斯数据生成机制下，PS 的经验后验可行性表现最为出色。

3. **所提出的 CR 方法是一种有竞争力且保守性较低的替代方案**。与 PM 和 RB 相比，CR 显著提升了安全性，同时在 $\alpha = 0.05$ 和 $\alpha = 0.10$ （表1）处通常能带来高于 PS 的利润。其实际违约率会随着α （图9）上升，表明其风险—回报权衡比 PS 更具“响应性”。

4. **存在一种强有力的经典比较方法（FPQ）**。FPQ 在 $\alpha = 0.01$ （表1）处的平均违约率最低，在其他 α 取值下也仍具竞争力。这并不令人意外，因为这里的数据生成过程与 OLS 预测模型高度匹配。重要的是，所提出的贝叶斯方法（CR/PS）提供了一套连贯的后验学习流程和明确的后验认证诊断（图11），这正是所提出的“后验可行性保证”理念的核心。

5. **在较大的 α 下，PS 的保守性**。在 $\alpha = 0.10$，PS 仍远比要求的安全水平更安全（$V_{\text{true}} \approx 0.0125$ 见表1），表明在当前选择下$N_{\text{scen}} = 300$ 以及“强制满足所有情景”的构造中存在保守性。这种保守性解释了图 4中的利润低于 CR/FPQ，以及图 10中的利润—风险前沿。

总体而言，在这些实验中，**当首要目标是安全性／后验可行性 (PS) 时，我们的方案表现最佳；CR 则提供了有竞争力的折中**，在安全性和利润之间取得平衡，并能针对风险参数 α 做出更精准的响应。

7 真实数据演示：从单细胞 RNA-seq 中安全地选择基因面板

7.1 数据集和科学任务

我们在一个真实的遗传数据集上展示了我们的后验可行性 贝叶斯线性规划方法论：PBMC3k单细胞RNA测序数据集（通过 scanpy Python

库处理并发布）。该数据集包含 $n_{\text{cells}} = 2638$ 个外周血单个核细胞和 $p = 1838$个基因，以及 8 组细胞类型注释（基于 Louvain 的聚类标签，由处理后的数据集提供）。图 12 展示了按簇着色的 UMAP 嵌入数据集。

目标（基因面板选择）。单细胞基因组学中一个常见的实验设计问题，是选择一个小型基因面板（例如用于靶向检测），使其在异质性细胞群体中始终具有信息量。我们将其表述为一个带预算约束的线性规划：从候选池中选择 $B = 30$ 个基因，以最大化簇间判别得分，同时施加后验可行性约束：每个簇的预期面板可检测性都应足够高，且具有较高的后验概率。

7.2 可检测性的贝叶斯建模与线性规划表述

候选基因池。我们从完整基因集中采用一种简单、透明的筛选方法，构建包含 $K = 300$ 个基因的候选池：筛选平均表达量簇间变异较大的基因（根据处理后的矩阵计算）。为每个候选基因 g 分配一个非负权重w_g ，其值等于该基因簇级平均表达量的方差。直观而言，w_g 越大，表示簇间分离越明显。

将可检测性视为不确定系数。对于每个簇 $j \in \{1, \dots, J\}$ 和候选基因 $g \in \{1, \dots, K\}$，我们定义一个检测指示变量

$$Y_{ijg} = \mathbf{1}\{\text{gene } g \text{ is detected in cell } i \text{ from cluster } j\},$$

并令 q_{jg} =Pr($Y_{ijg} = 1$) 表示簇特异性检测概率。使用共轭贝塔-二项模型，

$$q_{jg} \sim \text{Beta}(a_0, b_0), \qquad \sum_{i \in \mathcal{I}_j} Y_{ijg} \mid q_{jg} \sim \text{Binomial}(n_j, q_{jg}),$$

我们得到闭式后验分布

$$q_{jg} \mid D \sim \text{Beta}(a_0 + s_{jg},\ b_0 + n_j - s_{jg}),$$

其中，n_j 是簇 j 中的细胞数，s_{jg} 是基因 g 在簇 j中的观测检测数。我们采用均匀先验 $a_0 = b_0 = 1$。

决策变量和目标函数。令 $x_g \in [0, 1]$ 为候选基因 g的松弛选择变量；通过 $\sum_{g=1}^{K} x_g \le B$施加面板规模预算约束。目标函数为线性形式：

$$\max_{x} \sum_{g=1}^{K} w_g x_g.$$

后验可行性约束（所提方法：PS）。我们要求每个簇在后验分布下至少有 $L = 8$ 个预期可检测的面板基因，并以基于情景（后验抽样）的方式满足这一要求。具体而言，抽取 $S = 300$个独立同分布的后验样本 $q_{jg}^{(s)} \sim$

Beta(a_{jg}, b_{jg}) 并强制满足

$$\sum_{g=1}^{K} q_{jg}^{(s)} x_g \geq L, \qquad \forall j = 1, \ldots, J, \ \forall s = 1, \ldots, S.$$

一旦对后验情景完成抽样，这就是一个线性规划，也是本文提出的后验情景（*PS*）后验可行性构造。

硬面板提取。 求解松弛线性规划后，我们按照优化后的x_g 值排序，选取排名前 $B = 30$ 的基因，组成最终的基因面板。

7.3 后验可行性的经验认证

除在优化过程中强制执行情景约束外，我们还进行独立的后验蒙特卡罗认证：抽取 $M_{\text{cert}} = 4000$ 个新的(q_{jg})后验样本，并估计后验违约概率，

$$\widehat{V}_{\text{post}}(\hat{x}) = \frac{1}{M_{\text{cert}}} \sum_{\ell=1}^{M_{\text{cert}}} \mathbf{1}\Big\{\exists j : \sum_{g=1}^{K} q_{jg}^{(\ell)} \hat{x}_g < L\Big\}.$$

^我们还报告保守的单侧 95% Clopper–Pearson 上界$V_{\text{post, UB95}}$(^x)。

表5 汇总了全局认证结果，表6报告了各簇的覆盖度分布和违例率。图15 展示了各簇的后验覆盖度分布，图16汇总了可行与违反约束的后验抽样。

7.4 结果

簇组成。 表 3 显示了我们的可检测性模型所用的簇大小（$J = 8$簇）。

表3：用于基因可检测性建模的PBMC3k簇大小。

簇	细胞数
B细胞	342
CD14+ 单核细胞	480
CD4 T细胞	1144
CD8 T细胞	316
树突状细胞	37
FCGR3A+ 单核细胞	150
巨核细胞	15
NK细胞	154

选定基因面板。 表 4 列出了选定的 $B = 30$ 基因、其松弛线性规划选择值（x_g），以及判别分数（w_g）。图 13 中的条形图展示了w_g 值（选定面板）。

后验可行性证书。表5 报告了估计的后验违反概率及保守的95%上界。在本次运行中，后验违反估计为^ $\widehat{V}_{\text{post}} = 0.0205$，保守上界为$V_{\text{post, UB95}} = 0.024582$，这表明所选阈值 $L = 8$具有很强的后验可行性。

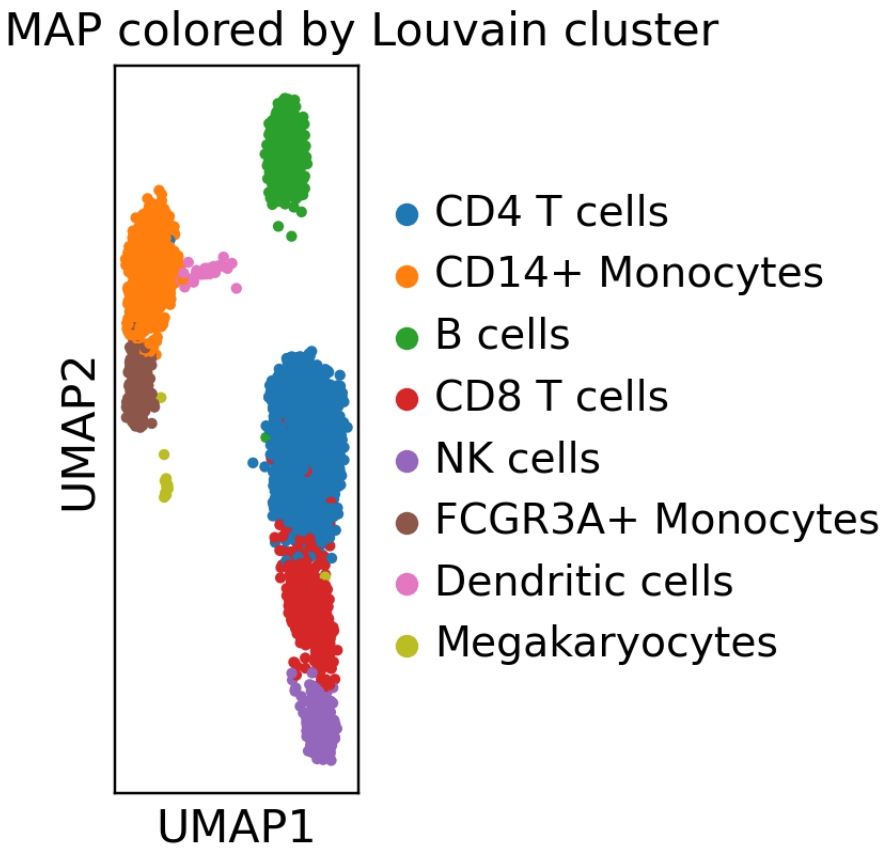


图 12：按提供的 8 个聚类标签着色的 PBMC3k UMAP 嵌入。

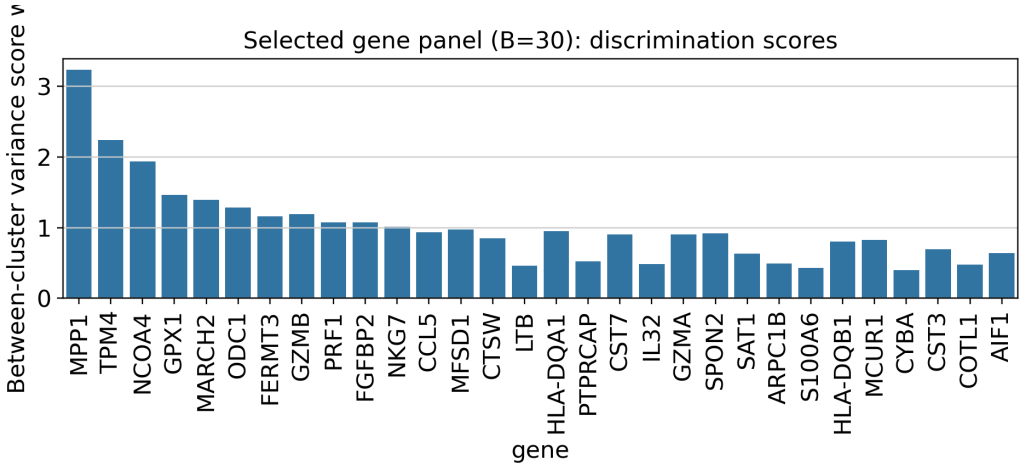


图 13：选定面板基因的判别权重 w_g（数值越大，簇间分离效果越好）。

分簇安全裕度。表6 展示了各簇覆盖度的后验分布（均值和选定分位数）$\sum_g q_{jg} \hat{} x_g$，以及根据 $\sum_g q_{jg} \hat{} x_g < L \mid D$估计的簇特异违规率 Pr(M_{cert} 后验抽样。最紧约束簇为CD4 T细胞和B细胞，其均值覆盖度（8.123 和 8.208）接近阈值 $L = 8$，且违例率非零（分别为 0.0120 和 0.00875）；其余簇则具有



图14：所选 $B = 30$基因面板的簇级平均表达量（处理后尺度）热图。该图简洁直观地展示了所选面板如何区分不同簇。

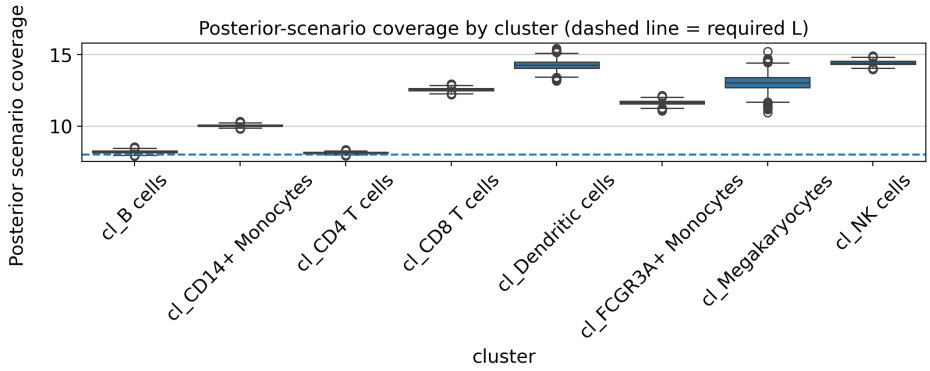


图15：按簇划分的后验情景覆盖分布：$\sum_g q_{jg} \hat{x}_g$ 在$M_{\text{cert}} = 4000$ 后验抽样中的箱线图。水平虚线表示所需阈值 $L = 8$。

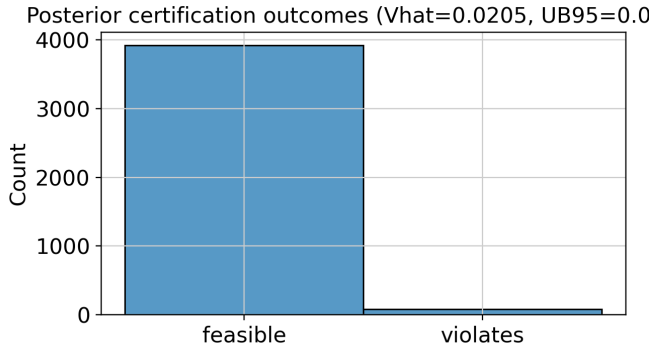


图16：后验可行性认证结果（可行与违反约束的后验抽样），$\hat{}$ $\hat{}$对应于 $V_{\text{post}} = 0.0205$ 和$V_{\text{post, UB95}} = 0.024582$ （表5）。

较大的松弛量。

7.5 主要发现

这项真实数据实验凸显了为何具备后验可行性 的贝叶斯线性规划在基因组学应用中具有实际价值：

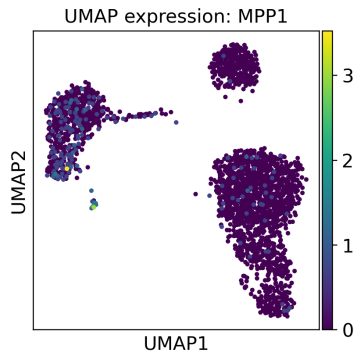


图 17：*
(a) MPP1

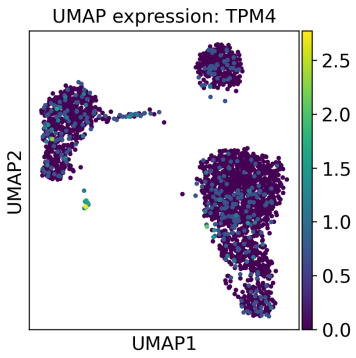


图 18：*
(b) TPM4

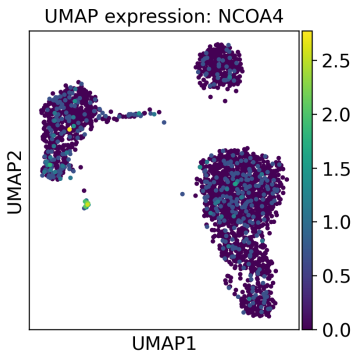


图 19：*
(c) NCOA4

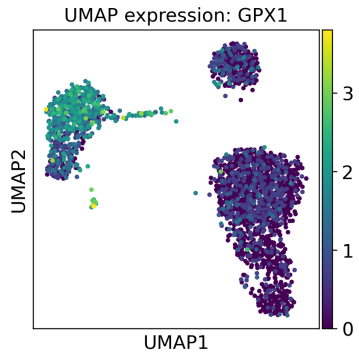


图 20：*
(d) GPX1

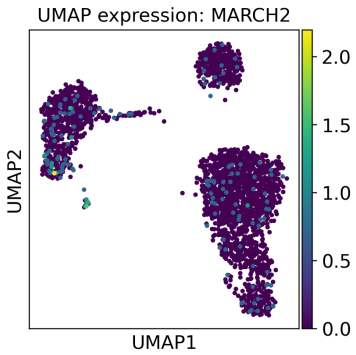


图 21：*
(e) MARCH2

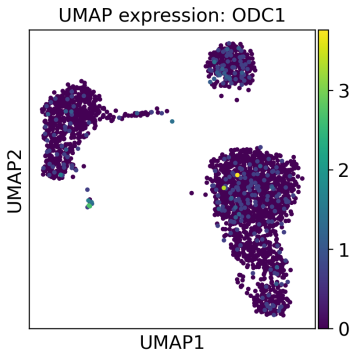


图 22：*
(f) ODC1

图23：选定面板中排名前六的基因（w_g最高）的 UMAP 特征图。

1. **具有明确不确定性感知安全约束的透明优化目标**。 目标函数（簇间可分性）易于理解，并与图 14中的可视化直接相关；而可行性则表示为具体的逐簇可检测性要求 $L = 8$ （图 15–16）。

2. **后验可行性得到了定量认证**。 选定面板的$\widehat{}$估计后验违反概率（$V_{\text{post}} = 0.0205$）较小，且保守的 95% 上界为 0.024582（表 5）。这是一项关于不确定性和可行性的可操作、可复现的结论，而不仅仅是一个点估计。

3. **该方法能够适应异质簇**。 逐簇汇总（表 6）显示，CD4 T细胞和B细胞是约束最紧的群体（平均覆盖度接近 L），而其他簇则有较大的余量。这种表现是理想的：线性规划会自动分配面板容量，以便在最难满足可行性要求的地方维持可行性。

4. **输出具有生物学可解释性且可审计**。 最终基因面板（表 4）和基因层面的空间表达模式（图 23）构成了从优化到科学解读的可审计桥梁，这对于基因组学决策流程而言往往至关重要。

PBMC3k 案例研究表明，我们的后验情景贝叶斯线性规划能够生成精简且易于解读的基因面板，并提供明确的后验可行性保证和诊断

表4：后验情景贝叶斯线性规划中的选定基因面板（$B = 30$）。

Rank	Gene	x_g （放宽）	w_g
1	MPP1	1.000000	3.230263
2	TPM4	1.000000	2.240738
3	NCOA4	1.000000	1.936093
4	GPX1	1.000000	1.462955
5	MARCH2	1.000000	1.389063
6	ODC1	1.000000	1.285478
7	FERMT3	1.000000	1.159700
8	GZMB	1.000000	1.190489
9	PRF1	1.000000	1.073113
10	成纤维细胞生长因子结合蛋白2	1.000000	1.073560
11	NKG7	1.000000	1.010056
12	CCL5	1.000000	0.931688
13	主要转化因子超家族结构域蛋白1	1.000000	0.972855
14	CTSW	1.000000	0.845375
15	LTB	1.000000	0.461896
16	人类白细胞抗原-DQ α链1	1.000000	0.949899
17	蛋白酪氨酸磷酸酶受体C型相关蛋白	1.000000	0.526779
18	CST7	1.000000	0.906956
19	IL32	1.000000	0.485118
20	GZMA	1.000000	0.901278
21	血小板反应蛋白1型结构域蛋白2	1.000000	0.915694
22	SAT1	1.000000	0.634532
23	ARPC1B	1.000000	0.488807
24	S100A6	1.000000	0.426665
25	HLA-DQB1	1.000000	0.803138
26	MCUR1	1.000000	0.825031
27	CYBA	1.000000	0.401687
28	CST3	1.000000	0.695318
29	COTL1	0.957915	0.477773
30	AIF1	0.801994	0.641515

Ta表 5：选定面板 ($B = 30$, $L = 8$) 的全局后验可行性证书。

α (意图)	B	L	S (最优)	M_{cert}	$\widehat{V}_{\text{post}}$	$\widehat{V}_{\text{post,UB95}}$
0.05	30	8.0	300	4000	0.0205	0.024582

表6：选定面板的按簇划分的后验覆盖率汇总（覆盖度 $= \sum_g q_{jg} \hat{x}_g$；阈值 $L = 8$）。

簇	Mean	5%	中位数	95%	违例率
B细胞	8.207970	8.053454	8.207325	8.366556	0.00875
CD14+ 单核细胞	10.043267	9.925323	10.043179	10.157165	0.00000
CD4 T细胞	8.123282	8.034384	8.125445	8.211415	0.01200
CD8 T细胞	12.563760	12.387628	12.563310	12.738323	0.00000
树突状细胞	14.274472	13.761980	14.272147	14.807459	0.00000
FCGR3A+ 单核细胞	11.642840	11.402140	11.641145	11.889237	0.00000
巨核细胞	13.059786	12.209755	13.053074	13.880318	0.00000
NK细胞	14.441874	14.210318	14.440666	14.669766	0.00000

工具；这种组合很难通过纯粹的插件式或纯启发式选择方法获得。

8 讨论

本文提出的框架源于一个简单却重要的观察：在当代许多线性规划应用中，不确定性并非仅仅是围绕固定模型的外生

扰动，而是统计学习的产物。一旦认识到这一点，自然就会提出这样的问题：评估可行性时，应依据学习得到的后验分布，而非仅仅依赖固定的名义估计。后验可行性的概念恰好搭建了这样的桥梁。

所提方法的一个核心概念优势在于，它区分了实践中常被混为一谈的两类推理来源。第一类涉及从数据中学习：在观测数据之后，系数的不确定性有多大？第二类涉及决策保护：面对这种不确定性，所得决策应保守到何种程度？贝叶斯更新处理前者，而本文提出的可行集构造处理后者。这种分离带来了更透明的决策流程，其中先验信息、观测数据、后验不确定性和优化保守性各自的作用都可以被明确审视。

本文研究的两种计算策略服务于不同目的。当人们希望得到一个确定性优化问题，并能在后验高概率区域上给出直接的最坏情形解释时，可信集鲁棒化颇具吸引力。它概念简单、计算稳定，但当可信区域较大或维数较高时，可能变得过于保守。相比之下，后验情景构造更为灵活，在后验抽样可行但解析可信区域难以刻画的复杂模型中往往更易实现。其主要优势在于与现代贝叶斯计算自然契合，但其实际表现取决于抽样情景的数量，若同时强制纳入过多极端后验实现值，则可能变得保守。

仿真研究清楚地凸显了这些权衡。后验情景方法在经验安全性方面表现最出色，而可信集鲁棒化则在安全性—利润权衡上更为均衡。同时，实验表明，没有任何一种方法能在所有指标上都占据优势。尤其是，当数据生成机制与经典预测模型高度吻合时，经过仔细设定的频率学派预测分位数方法仍然具有很强的竞争力。这一点十分重要：本研究的贡献并非证明贝叶斯方法在数值表现上必然始终占优，而是表明它们提供了一个连贯的框架，能够将从数据中学习到的不确定性传递至优化过程，并以易于理解的方式对其进行认证。

真实数据研究进一步展现了该框架在合成基准测试之外的价值。在PBMC3k单细胞RNA测序应用中，该方法生成了一个精简且易于解释的基因面板，并提供了明确的后验可行性诊断。这在科学应用中尤为重要，因为决策质量往往不仅需要通过目标函数值来传达，还需要借助透明的不确定性摘要和簇特异性安全裕度加以说明。分析结果表明，贝叶斯线性规划能够支持具有科学意义的决策，同时保留对不确定性进行显式处理的形式化结构。

还应承认若干局限。首先，本文中的后验保证以所假设的统计模型为条件；与所有贝叶斯方法一样，模型设定错误可能影响最终决策的质量。其次，当前分析主要聚焦于单阶段线性规划，未能充分处理补救决策、自适应性或序贯决策。第三，尽管基于情景的保证在理论上颇具吸引力，但其实用校准取决于样本量的选择，以及后验保护所需的保守程度。

尽管存在这些局限性，该方法论仍为学习到的不确定性下的决策提供了有用的概念与计算基础。更广泛地说，它表明，不确定性下的优化可以从与现代统计推断更紧密的结合中获益良多，尤其是在不确定性必须通过学习而非

假设。

8.1 扩展

与机会约束和凸保守近似的联系。 后验可行性是一种机会约束，其中后验分布是支配分布。在计算上，我们可以（i）用保守的确定性约束替代它（可信集鲁棒化，类似于凸保守近似），或（ii）施加抽样约束，并依赖情景理论 [8, 6, 7]。

与鲁棒优化的联系。 可信集鲁棒化会产生一个鲁棒对应问题，其中不确定性集是依赖于数据的（即可信区域），而非外生指定，从而补充了经典鲁棒优化 [1, 3, 5]。

目标不确定性与风险厌恶。 如果 $c(\theta)$ 存在不确定性，可以将 $\mathbb{E}[c(\theta)^\top x \mid D]$ 替换为对风险敏感的泛函，例如目标函数的后验分位数或条件风险价值（CVaR）。这与后验可行性自然相结合，但并非本文所提出的可行性保证所必需。

补救决策与多阶段决策。 本文研究单阶段决策 x。通过对不确定右端项建立贝叶斯模型，并将补救行动建模为 θ 的函数，可以将方法扩展至带补救决策的两阶段线性规划；情景法仍可应用于凸补救决策形式，但需要谨慎处理策略类。

9 结论

本文提出了一种用于线性规划的贝叶斯框架：不确定的优化输入从数据中学习得到，并通过后验可行性保证传导至决策。所提方法论将贝叶斯更新、可处理的可行性保障机制与求解后认证统一于同一流程。文中发展了两种互补构造：可信区域鲁棒化将后验不确定性转化为确定性防护；后验情景优化则利用后验样本，得到具有可解释有限样本支持、可实际实施的决策规则。在仿真实验中，所提方法相较于朴素代入式优化显著提升了安全性；真实数据研究则表明，该框架能够在真正的科学应用中生成可解释、具备不确定性意识的决策。

本研究开启了若干未来研究方向。一个自然的拓展方向是将其应用于多阶段线性规划和基于补救决策的线性规划，在这类问题中，后验不确定性必须与自适应决策规则相结合。另一个重要方向是开发保守性较低的情景构造方法和更精准的校准策略，以控制后验可行性。此外，研究模型设定错误下的理论稳健性，以及将方法拓展到混合整数和非线性优化问题，也很有价值。更广泛地说，本文表明，一项富有成效的研究议程是将贝叶斯学习直接融入优化理论，使决策不仅针对估计出的世界达到最优，还能附带明确且以数据为条件的可靠性保证。

声明

数据可用性。本研究使用的模拟数据集由作者提供的可复现代码生成。真实数据演示使用了通过 scanpy Python 生态系统发布的 PBMC3k 单细胞 RNA-seq 数据集。

代码可用性。用于模拟、真实数据分析、图表生成和可复现计算的所有代码均可在以下网址获取：

https://github.com/debashisdotchatterjee/Bayesian-LPP-with-Posterior-Feasibility-Guarantees

伦理审批。不适用。

经费支持。本研究未获得任何专项外部经费支持。

利益冲突。作者声明不存在任何利益冲突。

A 技术更正与证明

A.1 对高斯可信集表述的必要修正

第4 节关于高斯可信集的讨论需要一项重要澄清。命题4.1 是一个联合陈述：当存在一个可测集合 $\mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \subseteq \Theta$ 使得

$$\mathbb{P}(\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \mid D) \geq 1-\alpha$$

且所有约束对所有 $\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$ 均成立。

相反，如果定义逐行可信区域

$$\mathcal{C}_{1-\alpha,i}(D), \qquad i = 1, \ldots, m,$$

每个区域的后验概率均至少为 $1-\alpha$，那么这本身并不意味着联合事件

$$\bigcap_{i=1}^{m} \{\theta_i \in \mathcal{C}_{1-\alpha,i}(D)\}$$

其后验概率至少为 $1-\alpha$。因此，主要方法论中的文字应按以下两种正确方式之一理解。

选项 A：联合可信域。 令完整的不确定系数向量为

$$u(\theta) := \left(u_1(\theta)^\top, \ldots, u_m(\theta)^\top\right)^\top \in \mathbb{R}^{m(n+1)}, \qquad u_i(\theta) := \begin{bmatrix} a_i(\theta) \\ b_i(\theta) \end{bmatrix}.$$

If

$$u(\theta) \mid D \approx \mathcal{N}(\bar{u}, \Sigma),$$

那么，联合椭球可信域为

$$\mathcal{C}^{\text{joint}}_{1-\alpha}(D) = \left\{u : \ (u-\bar{u})^\top \Sigma^{-1} (u-\bar{u}) \leq \chi^2_{m(n+1)}(1-\alpha)\right\},$$

满足

$$\mathbb{P}\big(u(\theta) \in \mathcal{C}^{\text{joint}}_{1-\alpha}(D) \mid D\big) \approx 1-\alpha$$

在高斯近似下。如果对所有 $u \in \mathcal{C}_{1-\alpha}^{\text{joint}}$ (D都施加全部约束，那么命题4.1 可直接应用。

方案 B：经邦费罗尼校正的逐行可信域。或者，对每一行定义

$$\mathcal{C}_{1-\alpha/m,i}(D) = \left\{ u : \ (u - \bar{u}_i)^\top \Sigma_i^{-1} (u - \bar{u}) \le \chi^2_{n+1}(1-\alpha/m) \right\}.$$

如果对所有 $u_i \in \mathcal{C}_{1-\alpha/m,\ i}(D)$，稳健化后的逐行约束均成立，那么根据并集界

$$\mathbb{P}\left(\bigcap_{i=1}^{m} \{ u_i(\theta) \in \mathcal{C}_{1-\alpha/m,i}(D) \} \mid D \right) \ge 1 - \sum_{i=1}^{m} \frac{\alpha}{m} = 1 - \alpha.$$

因此，命题4.1 再次得到后验可行性。

校正后的逐行二阶锥形式。在经邦费罗尼校正的公式下，逐行二阶锥约束变为

$$\bar{u}_i^\top z(x) + \kappa_{\alpha/m} \left\| \Sigma_i^{1/2} z(x) \right\|_2 \le 0, \qquad \kappa_{\alpha/m} := \sqrt{\chi^2_{n+1}(1-\alpha/m)}, \tag{11}$$

其中

$$z(x) := \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix}.$$

如果正文保留各行独立的椭球，那么应使用这个校正版。

A.2 命题 4.1 的证明

命题 *4.1* 的证明。 回想一下

$$V_D(x) = \mathbb{P}_{\theta|D}\Big(\exists i \in \{1, \dots, m\} : g_i(x, \theta) > 0 \Big).$$

假设 x 满足

$$g_i(x, \theta) \le 0, \qquad \forall \theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D), \ \forall i = 1, \dots, m,$$

并且

$$\mathbb{P}(\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \mid D) \ge 1 - \alpha.$$

那么，只要 $\theta \in \mathcal{C}_{1-\alpha}(D)$，就不会发生违约。因此

$$\Big\{ \exists i : \ g_i(x, \theta) > 0 \Big\} \subseteq \{ \theta \notin \mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \}.$$

以 D 为条件取后验概率，得到

$$V_D(x) = \mathbb{P}_{\theta|D}\Big(\exists i : \ g_i(x, \theta) > 0 \Big) \le \mathbb{P}_{\theta|D}\big(\theta \notin \mathcal{C}_{1-\alpha}(D) \big) \le \alpha.$$

因此， x 是（$1 - \alpha$）后验可行的。 □

A.3 二阶锥鲁棒对偶的推导

现在我们推导高斯可信集讨论中使用的二阶锥表示。

命题 A.1（椭球鲁棒线性约束的二阶锥重构）。 设 $u \in \mathbb{R}^p$具有不确定性，并假设鲁棒约束

$$u^\top z \le 0 \qquad \forall u \in \mathcal{E},$$

是在该椭球上施加的

$$\mathcal{E} = \left\{ u : \ (u-\bar{u})^\top \Sigma^{-1} (u-\bar{u}) \le \rho^2 \right\},$$

其中 $\Sigma \succ 0$ 和 $\rho > 0$。那么，这个鲁棒约束等价于

$$\bar{u}^\top z + \rho \left\| \Sigma^{1/2} z \right\|_2 \le 0.$$

证明。 令 $u = \bar{u} + \Sigma^{1/2} v$，此时椭球条件变为

$$v^\top v \le \rho^2.$$

Then

$$u^\top z = \bar{u}^\top z + v^\top \Sigma^{1/2} z.$$

因此

$$\sup_{u \in \mathcal{E}} u^\top z = \bar{u}^\top z + \sup_{\|v\|_2 \le \rho} v^\top \Sigma^{1/2} z.$$

根据柯西–施瓦茨不等式,

$$v^\top \Sigma^{1/2} z \le \|v\|_2 \left\| \Sigma^{1/2} z \right\|_2 \le \rho \left\| \Sigma^{1/2} z \right\|_2,$$

取以下值时等号成立

$$v = \rho \frac{\Sigma^{1/2} z}{\|\Sigma^{1/2} z\|_2}$$

当 $\Sigma^{1/2} z \neq 0$。因此

$$\sup_{u \in \mathcal{E}} u^\top z = \bar{u}^\top z + \rho \left\| \Sigma^{1/2} z \right\|_2.$$

因此，鲁棒不等式

$$u^\top z \le 0 \quad \forall u \in \mathcal{E}$$

成立当且仅当

$$\bar{u}^\top z + \rho \left\| \Sigma^{1/2} z \right\|_2 \le 0.$$

□

备注 A.1. 命题 A.1 是鲁棒优化中的标准结果；例如，参见 Ben-Tal 等人 [1, 第 2] 以及 Bertsimas 等人。 [4]。

A.4 情景定理：正确解读与证明思路

定理 4.1 在正文中并未在此从第一性原理出发证明，因为它是 Calafiore 和 Campi [6] 以及 Campi 和 Garatti [7]所建立的凸规划标准情景定理的直接特例。若要给出一份完全自洽的证明，就必须重述这些论文中的支持约束论证及相关的组合计数论证。

为了准确说明其与相关文献的关系，应按以下方式理解该定理。

定理 A.1（后验情景界；精确定式）。 假设：

1. $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ 是凸且紧的；

2. 对每个 θ，映射 $x \mapsto g_i(x,\theta)$ 对所有 $i = 1,\ldots,m$，在 $\mathcal{X}$ 上均为凸函数；

3. 对于每个独立同分布样本 $\theta^{(1)},\ldots,\theta^{(N)} \sim p(\theta \mid D)$，抽样得到的凸规划存在可行解和唯一优化器；更一般地，存在可测的平局处理选择；

4. Campi 和 *Garatti* 的情景定理 *[7]* 适用，且支撑秩（或 *Helly* 维数）至多为 d。

那么，对于后验情景规划的优化器 x_N，

$$\mathbb{P}_{\theta^{(1:N)}|D}\Big(V_D(x_N) > \varepsilon\Big) \le \sum_{j=0}^{d-1} \binom{N}{j} \varepsilon^j (1-\varepsilon)^{N-j}, \qquad \varepsilon \in (0,1),$$

其中，概率是针对用于构建情景规划的独立同分布后验样本而言的。

定理的证明 *A.1*。 在给定观测数据 D的条件下，后验分布 $p(\theta \mid D)$ 是不确定性空间 Θ上的普通概率分布。因此，后验情景问题恰好是一个标准的情景凸规划问题，其中不确定性样本是从分布 $p(\theta \mid D)$ 中独立同分布抽取的。

在假设 (i)–(iv) 下，Campi 和 Garatti 的抽象情景定理 [7] 可直接应用。他们的结果指出，如果一个凸情景规划由从不确定性空间上的某一概率律中抽取的 N 独立同分布样本构成，那么所得优化器的违约概率超过 ε 的概率至多为

$$\sum_{j=0}^{d-1} \binom{N}{j} \varepsilon^j (1-\varepsilon)^{N-j},$$

其中，d 表示该定理中的支撑秩 / Helly 维数。将该结果应用于抽样律等于后验分布 $p(\theta \mid D)$ 的情形，即可得到所述不等式。

□

注 A.2。 关键在于，一旦我们对观测数据 D 进行条件化，后验分布就成为情景规划的抽样律。因此，无需新的组合证明；后验情景定理只是标准情景定理在给定数据条件下的直接特例。

A.5 推论4.1的证明

推论*4.1*的证明。由定理A.1，对任意 $\varepsilon \in (0,1)$，

$$\mathbb{P}_{\theta^{(1:N)}|D}\Big(V_D(x_N) > \varepsilon\Big) \le \sum_{j=0}^{d-1} \binom{N}{j} \varepsilon^j (1-\varepsilon)^{N-j}.$$

如果选择 N，使得

$$\sum_{j=0}^{d-1} \binom{N}{j} \varepsilon^j (1-\varepsilon)^{N-j} \le \delta,$$

then

$$\mathbb{P}_{\theta^{(1:N)}|D}\Big(V_D(x_N) > \varepsilon\Big) \le \delta.$$

等价地，

$$\mathbb{P}_{\theta^{(1:N)}|D}\Big(V_D(x_N) \le \varepsilon\Big) \ge 1 - \delta.$$

这正是所声称的结果。 □

A.6 M蒙特卡洛认证：精确二项模型与置信界 s

求解后认证步骤可以进行直接的精确分析。

命题 A.2 （违反次数的精确二项分布）。 固定一个候选解 $\hat{x}$。令

$$I_\ell := \mathbf{1}\Big\{\exists i:\ g_i(\hat{x}, \tilde{\theta}^{(\ell)}) > 0\Big\}, \qquad \ell = 1, \dots, M,$$

其中 $\tilde{\theta}^{(1)}, \dots, \tilde{\theta}^{(M)}$ 是来自 $p(\theta \mid D)$的独立同分布样本。于是

$$I_1, \dots, I_M \overset{i.i.d.}{\sim} \mathrm{Bernoulli}(V_D(\hat{x})),$$

因此

$$S_M := \sum_{\ell=1}^{M} I_\ell \sim \mathrm{Binomial}(M, V_D(\hat{x})).$$

证明。 根据定义，

$$\mathbb{P}(I_\ell = 1 \mid D) = \mathbb{P}_{\theta|D}\Big(\exists i:\ g_i(\hat{x}, \theta) > 0\Big) = V_D(\hat{x}).$$

由于后验抽样 $\tilde{\theta}^{(1)}, \dots, \tilde{\theta}^{(M)}$ 是独立同分布的，因此指示变量 $I_1, \dots, I_M$是成功概率为 $V_D(\hat{x})$ 的独立同分布伯努利分布变量。将它们相加得到二项分布。 □

命题 A.3 (Clopper–Pearson 上置信界)。 设观测到 $S_M = s$ 。对于任意置信水平 $1 - \beta \in (0,1)$，定义

$$u_{1-\beta}(s, M) := F^{-1}_{\mathrm{Beta}(s+1, M-s)}(1 - \beta),$$

其中， $F^{-1}_{\mathrm{Beta}(a,b)}$ 表示 $\mathrm{Beta}(a, b)$ 分布的分位数函数。于是

$$\mathbb{P}\big(V_D(\hat{x}) \le u_{1-\beta}(S_M, M) \mid D\big) \ge 1 - \beta.$$

等价地，

$$1 - u_{1-\beta}(S_M, M)$$

是后验可行性概率的保守下置信界

$$1 - V_D(\hat{x}).$$

证明。 由命题 A.2，在给定 D 的条件下，计数 S_M 服从 $\mathrm{Binomial}(M, V_D(\hat{x}))$ 分布。Clopper–Pearson 区间是通过对二项检验求逆得到的精确等尾置信区间。特别地，单侧上端点 $u_{1-\beta}(s, M)$ 被定义为满足下述条件的唯一值

$$\mathbb{P}_{p=u_{1-\beta}(s,M)}\big(\mathrm{Binomial}(M, p) \le s\big) = \beta,$$

这等价于上文的 Beta分位数表达式。因此，标准的精确二项置信区间理论给出

$$\mathbb{P}\big(V_D(\hat{x}) \le u_{1-\beta}(S_M, M) \mid D\big) \ge 1 - \beta.$$

用 1 减去该值，即可得到后验可行性对应的置信下界。

□

备注 A.3. 关于精确二项置信界及其 Beta分位数表示，可参阅 Clopper–Pearson 区间的标准论述。此处未使用渐近近似。

A.7 证明来源的文献说明

本附录中的直接证明对以下内容均为自足的：

- 命题4.1，
- 命题A.1中的二阶锥重构，
- 推论4.1，
- 命题A.2和 A.3中的蒙特卡洛认证结果

场景可行性界不从头推导，因为其证明采用的是标准的支持约束计数论证，该论证已由 Calafiore 和 Campi [6]以及 Campi 和 Garatti [7]确立；所提出的定理是通过将抽样律设为后验分布 $p(\theta \mid D)$而直接特化得到的。

参考文献

[1] Aharon Ben-Tal、Laurent El Ghaoui 和 Arkadi Nemirovski。《鲁棒优化》。普林斯顿大学出版社，2009年。ISBN 9780691143682。[2] James O. Berger。《统计决策理论与贝叶斯分析》。Springer，第2版，1985年。doi：10.1007/978-1-4757-4286-2。[3] Dimitris Bertsimas 和 Melvyn Sim。鲁棒性的代价。《*Operations Research*》，52(1)：35–53，2004年。doi：10.1287/opre.1030.0065。[4] Dimitris Bertsimas、Dessislava Pachamanova 和 Melvyn Sim。一般范数下的鲁棒线性优化。《*Operations Research Letters*》，32：510–516，2004年。doi：10.1016/j.orl. 2003.12.007。[5] Dimitris Bertsimas、David B. Brown 和 Constantine Caramanis。鲁棒优化的理论与应用。《*SIAM Review*》，53(3)：464–501，2011年。doi：10.1137/080734510。[6] Giuseppe C. Calafiore 和 Marco C. Campi。鲁棒控制设计的情景法。《*IEEE Transactions on AutomaticControl*》，51(5)：742–753，2006年。doi：10.1109/ TAC.2006.875041。[7] Marco C. Campi 和 Simone Garatti。不确定凸规划中随机化解的精确可行性。《*SIAM Journal on Optimization*》，19(3)：1211–1230，2008年。doi：10.1137/07069821X。

[8] Arkadi Nemirovski 和 Alexander Shapiro。机会约束规划的凸近似。《*SIAM Journal on Optimization*》，17(4)：969–996，2006年。doi：10.1137/050622328。[9] Andr´as Pr´ekopa。《随机规划》。Springer，1995年。doi：10.1007/978-94-017-3087-7。[10] Alexander Shapiro、Darinka Dentcheva 和 Andrzej Ruszczy´nski。《随机规划讲义：建模与理论》。SIAM，2009年。doi：10.1137/1.9780898718751。